Title	数値計算シミュレーションとはいったい？<レポート執筆講座 (数値シミュレーション) >
Author(s)	池見, 友介
Citation	(2019)
Issue Date	2019-06-28
URL	http://hdl.handle.net/2433/252419
Right	
Type	Presentation
Textversion	author

数値計算シミュレーションとはいったい？

エネルギー科学研究科
エネルギー変換科学専攻
修士二回生
池見　友介

今日の内容

- 一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）
- なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか
- 数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）
- 数値流体力学(CFD)を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

自己紹介

- 名前：池見友介
- 所属：エネ研燃焼工学研究室修士二回生
- 研究内容：ディーゼルエンジン筒内燃焼の
  数値シミュレーション
  （Large eddy simulation:LES)
- 出身：滋賀県
- 家：熊野寮
- マイブーム：パン屋めぐり（いい運動にもなる）

今日の内容

- 一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）

- なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか

- 数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）

- 数値流体力学(CFD)を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）

- 数値計算

コンピューターを使って、代数的または解析的に解くことが困難な問題、または手計算では不可能な計算量が膨大な問題を近似的に解くこと。

＋

- シミュレーション

何らかのシステムの挙動を、それとほぼ同じ法則に支配される他のシステムやコンピュータなどによって模擬すること。模擬実験。

- 数値シミュレーション

自然現象や社会現象を定量的に扱うために作られた**数値モデル**を元にコンピュータ上で行う模擬実験のこと。

一般に実験と比較してシミュレーションとよばれるものがこれ！

↔ 物理的シミュレーション

家の耐震実験、相似風洞試験もこれ

数値解析と数値計算はどこが違う？

数値解析（すうちかいせき、*Numerical Analysis*）は、数学および物理学の一分野で、代数的な方法で解を得ることが不可能な解析学上の問題を（通常は有限精度の）数値を用いて近似的に解く手法に関する学問である。

- 1. 定積分のような連続的な問題に対しては「離散的 (discrete)」な「近似 (approximation)」を考え
- 2. 有限回の演算を行うことで解決を図る方法 (アルゴリズム) を探り
- 3. 実際に計算し，計算結果を検証する ことを研究する学問を「数値解析」と呼び，この際に行われる計算を「数値計算」と呼ぶ。

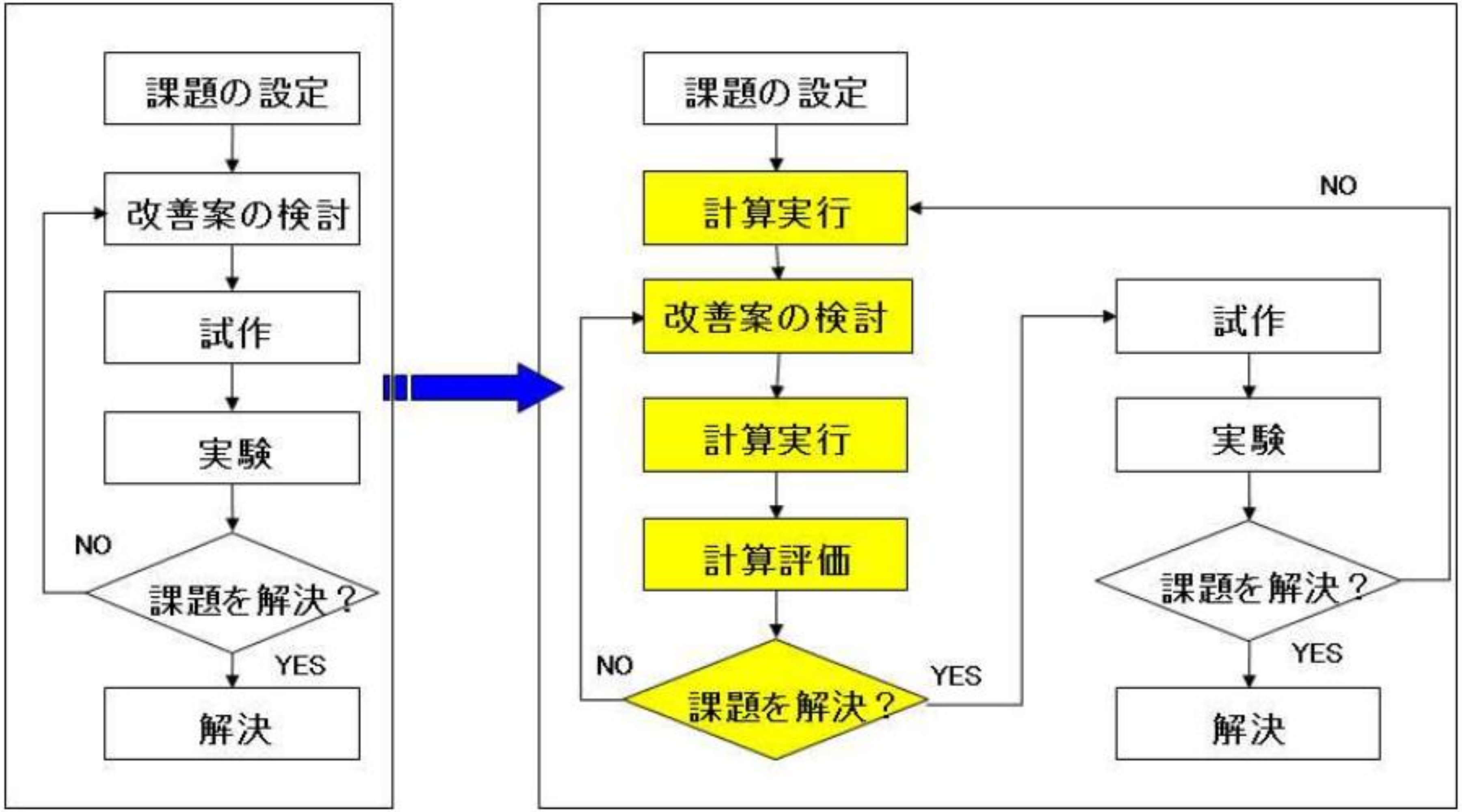
数値解析の一手法としてのコンピュータ・シミュレーション

- 古来、システムの形式的モデル化には解析学が用いられ、代数的に解を求めることで、あるパラメータと初期条件におけるシステムの振る舞いを予測することがおこなわれてきた。
- これに対し、数値を具体的に計算することによる手法を数値解析という。コンピュータ・シミュレーションは、**コンピュータを使わないことには計算量的に現実的でない数値解析をコンピュータによっておこなう。** 代数的な解法や単純な計算では不可能な場合の補助あるいは置換として使われることが多い。

今日の内容

- 一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）
- なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか
- 数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）
- 数値流体力学(CFD)を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

なぜ実験ではなく、
数値シミュレーションを行うのか



なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか

	実験	数値シミュレーション
コスト	小さな金型の製作で5千万～，まして車1台試作すると・・	基本的には計算機コストのみ
試行にかかる時間	天体運動などは数万年単位がありうる	計算時間の問題で実時間とは別
危険性	大気圏中の核実験はもう不可能．限定的な地下核実験しかできない．	直接人間に危害が及ぶことは無い
再現性	非常に稀な自然現象では，十分に確認するのが難しい	必要回数だけ試行できる．
観測性	観測は物理量に影響を及ぼす。一部のデータのみ取得可能	全物理量を全領域で得られる

⇒ 計算機能力の向上により、研究・開発の加速に有用となった。

今日の内容

- 一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）
- なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか
- 数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）
- 数値流体力学(CFD)を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）

- 物理学
- 気象予報
- 電子工学
- 生命科学
- 金融・経済
- etc....

<u>現象を数式でモデル化すれば、</u>
どこにでも数値シミュレーションを適用できる！

第1表　計算力学の利用分野

環境	気象	数値予報、台風進路予測、水の気化・液化、太陽熱、赤外線冷却、雲の物理
	海洋	気候、海洋大循環、黒潮・親潮、漁業管理、資源管理
	地殻	地震予知、地震波解析、地殻変動、地球形成・内部熱、地下資源探査
	地表	画像処理、衛星写真解析、フィルタリング
設計	建築	高層ビルの耐震計算(超高層化、超耐震化)、ビル谷間気流、ビルの熱管理
	土木	橋梁の耐震・耐風計算、港湾の津波・災害対策、丘陵安定性、ダム、地下街
	航空機	翼形と空気抵抗、翼胴、スペースシャトル、機体構造
	自動車	車体構造、車形と空気抵抗、衝突
	船舶	船体の耐波構造、タンカー、渦対策
	原子炉	炉構造、安全性解析、動特性
	機械	エンジン、精密構造、材料力学、回転系
	電子	集積回路、デバイスシミュレーション、半導体解析、磁気ヘッド解析
	電力	潮流計算、最適設計
	音響	HiFiスピーカー、音楽堂
	スポーツ	ゴルフボール、野球製品、スキーのジャンプ、グライダー、ヨット
	化学	化合物模型、合成シミュレーション、反応過程、新素材
	経済	世界統計、経済ダイナミックス
エネルギー	核融合	電磁流体、トカマク、粒子シミュレーション、レーザー形、磁気核融合
	原子炉	中性子拡散、輸送、熱流動
	石油	弾性波探鉱、画像探査、貯蔵所モデル
自然研究	原子分子	構造、反応、スペクトル分析
	固体	帯構造、超伝導、界面、表面、合金、超格子構造
	不規則系	ガラス、液態、スピン系、相転移
	原子核	核構造、核反応
	素粒子	クォーク、格子ゲージ理論、量子電磁力学、量子色力学
	結晶	X線解析、粒子線解析、幾何構造、超音波
	生体	生体反応、骨格構造、生体動力学、遺伝子解析、遺伝子操作
	天体	恒星進化、超新星、星雲、太陽内部対流、銀河構造、ブラックホール
	流体	乱流、衝撃波、層流、電磁流体、音波、分子動力学
	電磁波	磁場解析、レーザー光

今日の内容

- 一般に、数値計算・シミュレーションとは何を指すか（定義）
- なぜ実験ではなく、数値シミュレーションを行うのか
- 数値シミュレーションにはどのようなものがあるか（具体例）
- 数値流体力学(CFD)を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

  CFDがどう機能しているかを知り、その他の数値シミュレーションでも同様のことが起きているんだなというイメージを持ってもらう

数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

- 数値流体力学（CFD）とは

Computational Fluid Dynamicsのことで、CFDと略される

<u>コンピュータを用いた流体力学</u>　という学問の一体系

- 流体を記述する方程式とは：ナビエ・ストークス方程式

（運動方程式を流体に合わせて変形したものです）

二階の非線形偏微分方程式で、特別な場合を除き解析的に解けない式

x 方向
$$\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} + \nu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) + F_x$$

y 方向
$$\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial y} + \nu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) + F_y$$

z 方向
$$\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} + \nu\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) + F_z$$

時間項　移流項（対流項）　圧力項　粘性項　外力項

実際に数値シミュレーションを行う場合、どのような手順を踏むか(CFDの場合)

- 1, 前処理（プリプロセス、pre-process）

1-1　モデルデータ作成

対象物体の形状を再現した3Dまたは2Dモデルを作成する。設計にCADを使用し、そのデータを用いることが多い。

1-2　格子生成

数値流体力学では空間を離散的に扱うため、物体形状および周りの空間を離散化する必要があり、一般には計算格子（グリッドあるいはメッシュとも）で表現する。格子生成には四面体などを用いた非構造格子法、直方体を用いた構造格子法などがある。格子点数を大きくすれば結果の精度が上がるものの解析にかかる時間が増大する。

実際に数値シミュレーションを行う場合、どのような手順を踏むか(CFDの場合)

- 2, 解析

コンピュータによる反復計算を用いて格子毎の流れ方程式の近似解を求める。計算の結果として、各格子ごとの圧力・流速・密度などが求まる。格子点数やスキーム、コンピュータの性能にもよるが、長い時間を必要とすることが多い。

- 3, 後処理（ポストプロセス、post-process）

3-1 数値的な出力

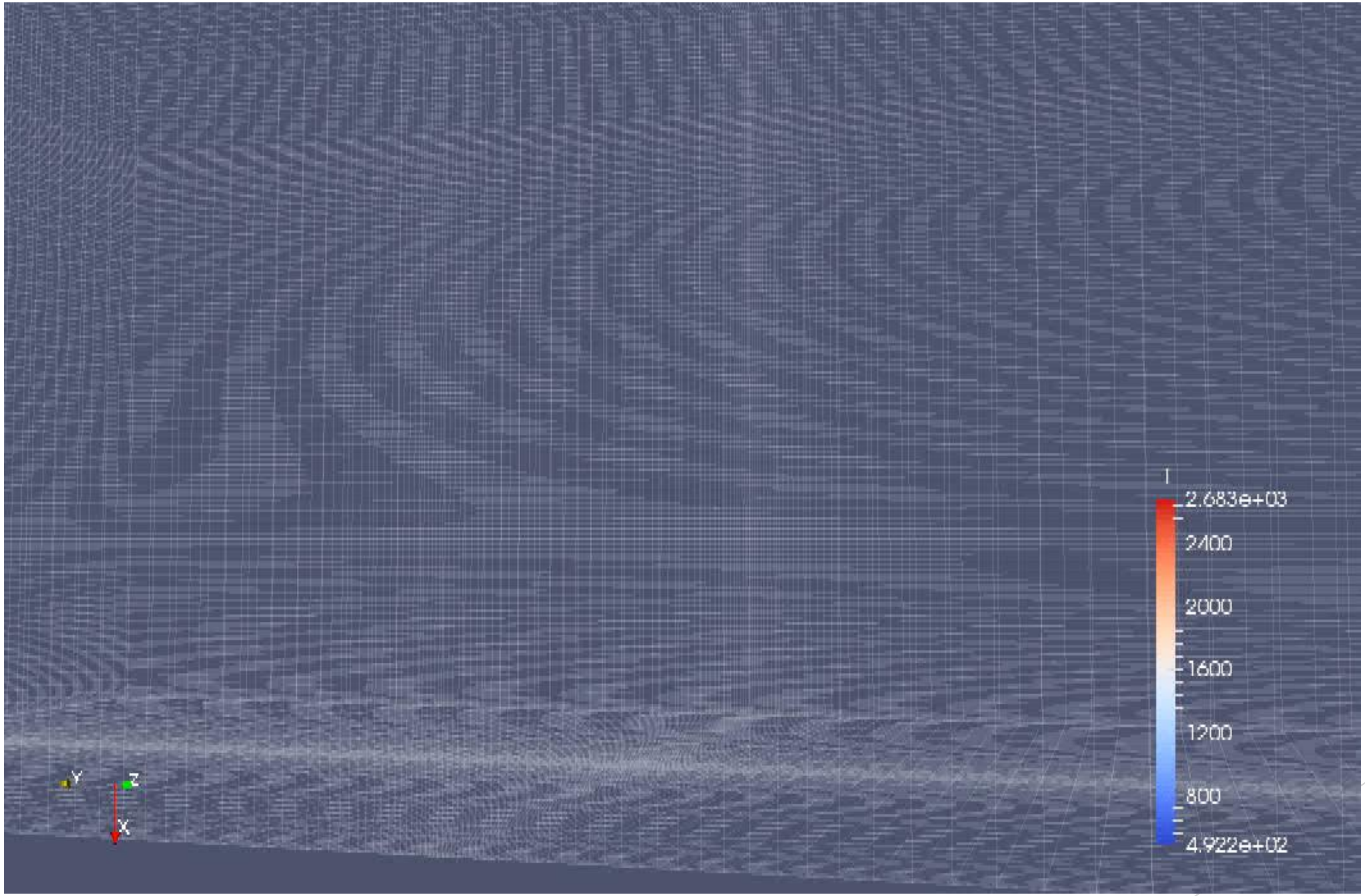
計測器などの制約から実際には測定ができないような箇所でも、数値解析では計算領域内ならどこでも物理量を得ることができる。

3-2, 可視化

流れ場の把握などのために、解析結果の可視化を行なう。物体表面および周辺流れの圧力分布を色で表現したり、流線を曲線で表すなど。

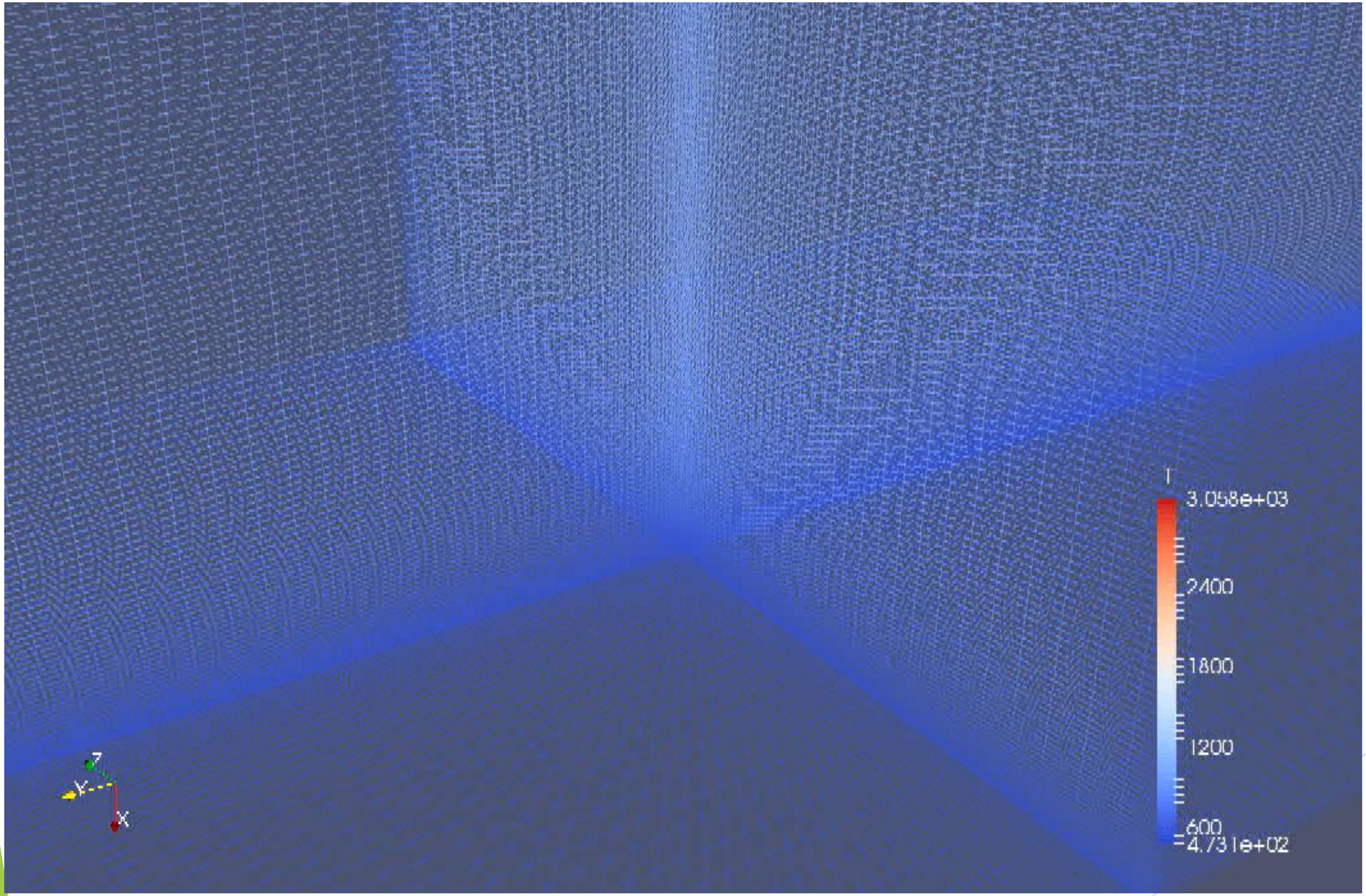
数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

- 非定常流動＋燃焼計算の一例



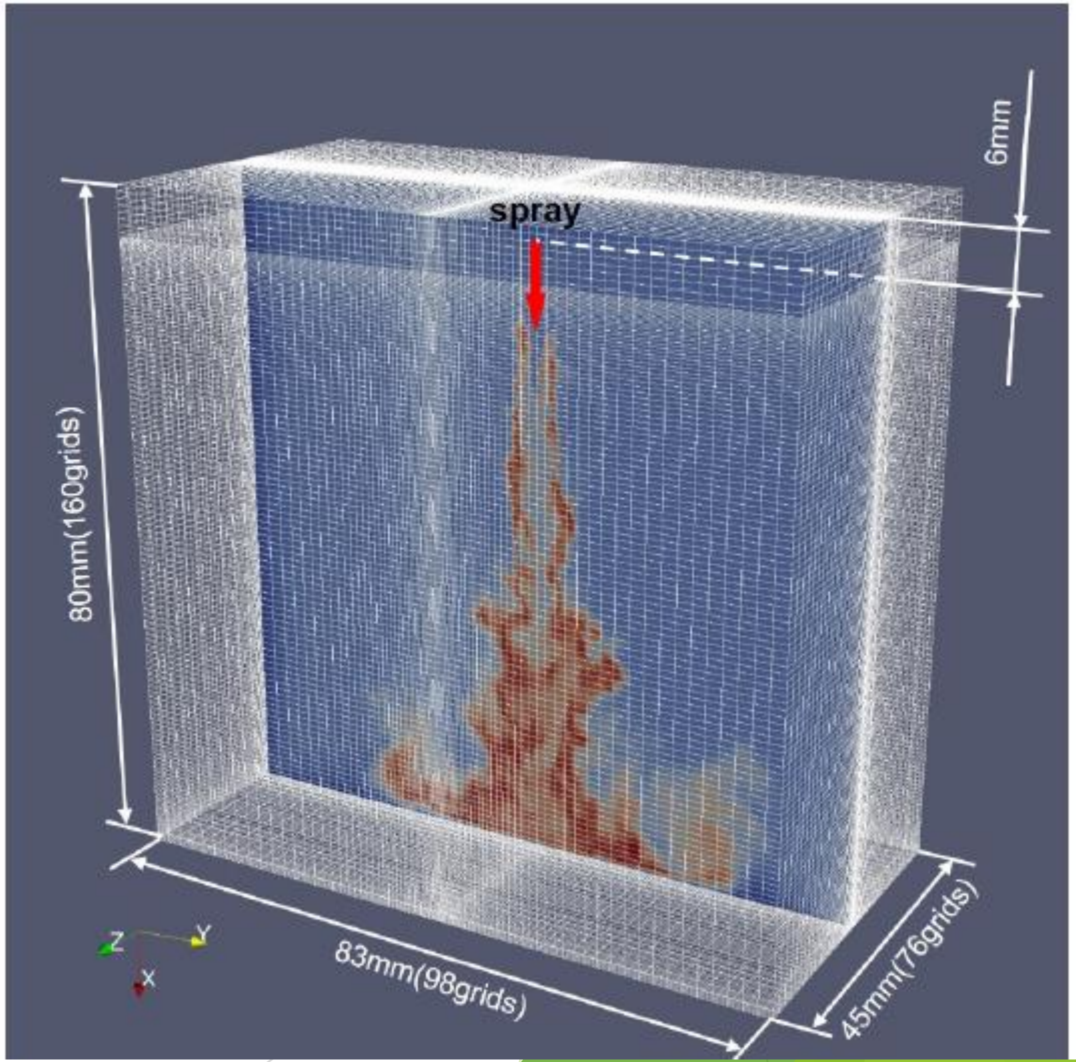
数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

- 非定常流動＋燃焼計算の一例



数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

約５０万セルの格子



- 解けない式を、むりやり解く

複雑な式でも、左辺の式と右辺の式に値を代入して、両辺が等しくなればそれらは解のひとつ！！

$$\frac{\partial \bar{\rho} V_f}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \overline{\dot{\rho}^s} \quad , \tag{1}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i V_f}{\partial t} + \frac{\partial \left(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tau_{ij}^{SGS} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{F_i^s} \, , \tag{2}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}_m V_f}{\partial t} + \frac{\partial \left(\bar{\rho} \tilde{f}_m \tilde{u}_j + j_{i,m}^{SGS} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{j}_{j,m} + \bar{\omega}_m + \overline{\dot{\rho}_m^s} \, , \tag{3}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} V_f}{\partial t} + \frac{\partial \left(\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j + q_j^{SGS} \right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p_0 V_f}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{q}_j + \overline{\dot{Q}^s} \, , \tag{4}$$

数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

数値モデル化＝離散化とは

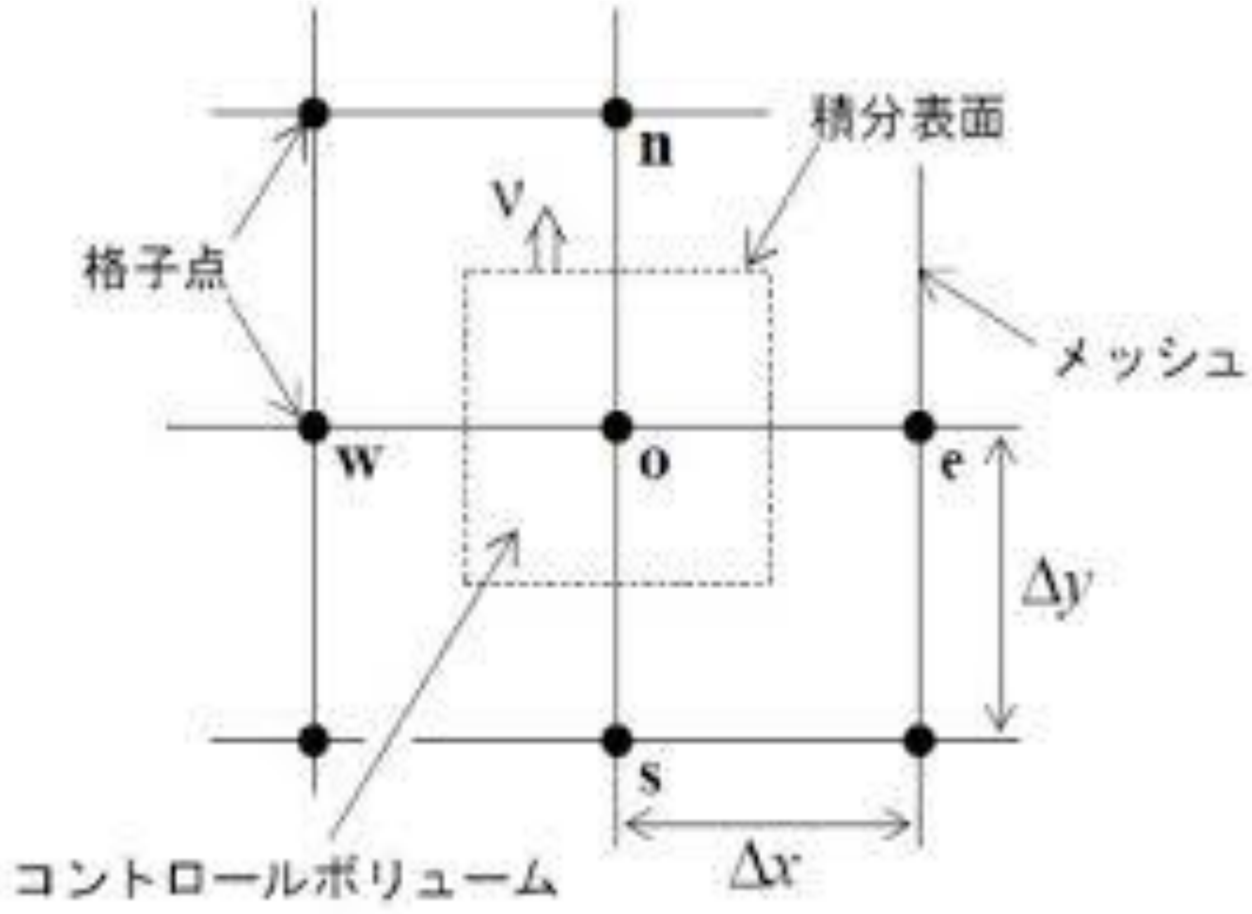
$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t)$$

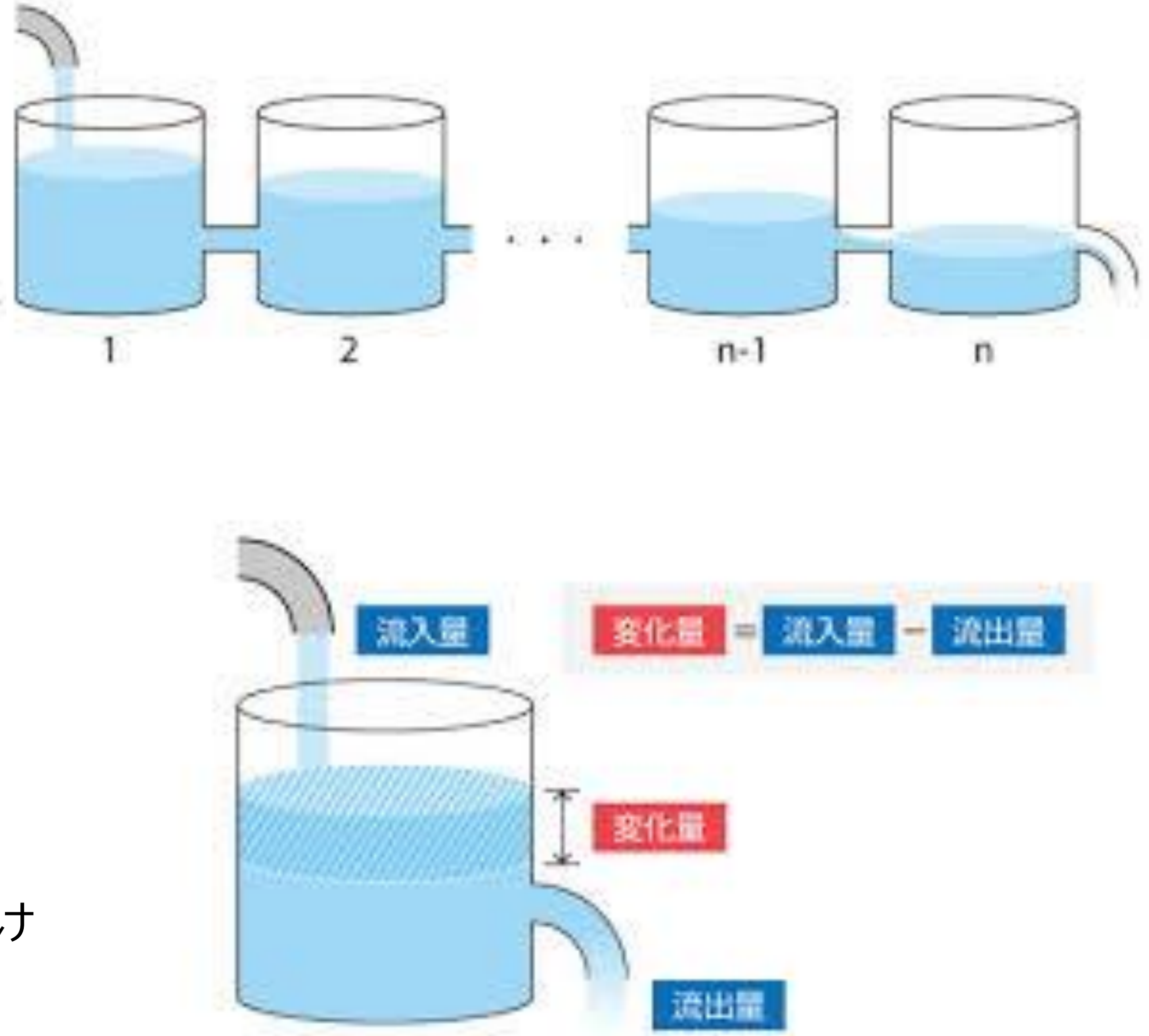
微分方程式は、連続な系であり、そのままコンピュータ上では取り扱えない（コンピュータは0,1の離散データ（ビット）の演算を高速で行う装置＝高級電卓）。

$$\boxed{\frac{q(t+t)-q(t)}{\Delta t} = -\lambda q(t)}$$

コンピュータ上で取り扱える式（代数方程式＝四則演算のみの式）に変換することを離散化という。

有限体積法について（空間離散化手法の一つ）





コントロールボリューム間で、質量や熱量などが受け渡される。それらの保存式を計算に使う

数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

微分方程式を離散化すると、一連の連立方程式ができる

要素数が*100*万であれば、*100*万元の連立*1*次方程式を変数の数だけ解かなければいけない。

この方程式群は行列形式で

表現することができ、

直接法

反復法

などを用いて解ける

$$
\begin{array}{l|l}
 & \begin{array}{cccc} \text{温度変数}T_1\text{の係数} & \text{温度変数}T_2\text{の係数} & \text{温度変数}T_{N\_Tval}\text{の係数} & \qquad \text{保存式の定数項達} \end{array} \\
\begin{array}{l} \text{要素1に関する保存式の係数達} \\ \text{要素2に関する保存式の係数達} \\ \\ \\ \\ \text{要素N\_Tvalに関する保存式の係数達} \end{array} &
\begin{bmatrix}
kami_{1,1}, kami_{1,2},,,,,, kami_{1,N\_Tval} \\
kami_{2,1}, kami_{2,2},,,,,, kami_{2,N\_Tval} \\
, \\
, \\
, \\
kami_{N\_T\_val,1}, kami_{N\_T\_val,2},,,,,, kami_{2,N\_Tval}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
kai_1 \\
kai_2 \\
, \\
, \\
, \\
kai_{N\_Tval}
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

反復法と収束判定

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

k回目の反復における解の推定値(k)

$$\mathbf{x}^{(k)} = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

反復

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right) \quad (1 \leq i \leq n)$$

反復法

連立1次方程式に適当な初期値を代入し、

得られた結果を繰り返し元の方程式に代入することで解を得る方法。

<u>適切な条件</u>のもとで， k ⇒k+1のプロセスを繰り返す ことによって， x (k)は正しい解に収束していく。

- [A]{x}={b}という方程式を解いているので， |b-Ax|~0となれば収束したとみなすことができる。
- 通常は「残差」が予め設定した値より小さくなった場合に収束したとみなす。

その値は要求される精度によって異なる。

<u>これがコンピュータの力を使って</u>
<u>数理モデルを解く部分！！</u>

収束条件 $$\frac{\sum_{j \neq i} |a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1 \qquad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

反復法の具体例：ヤコビ法

漸化式を作り反復していくと・・・

$$3x+2y+z=4$$
$$x+3y-2z=6$$
$$2x-y+4z=-3$$

$$\Rightarrow$$

$$x^{(p+1)}=\frac{1}{3}(4-2y^{(p)}-z^{(p)}),$$
$$y^{(p+1)}=\frac{1}{3}(6-x^{(p)}+2z^{(p)}),\qquad p=0,1,\ldots$$
$$z^{(p+1)}=\frac{1}{4}(-3-2x^{(p)}+y^{(p)})$$

計算結果

p	$x^{(p)}$	$y^{(p)}$	$z^{(p)}$
0	0.00000d+00	0.00000d+00	0.00000d+00
1	1.33333d+00	2.00000d+00	-7.50000d-01
2	2.50000d-01	1.05556d+00	-9.16667d-01
	...	...	...
8	8.32240d-01	1.17504d+00	-8.53188d-01
9	8.34372d-01	1.15379d+00	-8.72361d-01
10	8.54924d-01	1.14030d+00	-8.78738d-01
	...	...	...
18	9.30372d-01	1.06688d+00	-9.43441d-01
19	9.36558d-01	1.06092d+00	-9.48465d-01
20	9.42211d-01	1.05550d+00	-9.53050d-01
	...	...	...
28	9.72577d-01	1.02634d+00	-9.77722d-01
29	9.75016d-01	1.02399d+00	-9.79704d-01
30	9.77239d-01	1.02186d+00	-9.81510d-01

- 反復法は打切り誤差を生じる為, 一般に直接法に比べて精度が落ちる. しかも, 必ず解けるとは限らない. しかしながら, 特に大きな次数の連立方程式については, 反復法の方が計算量の面で有利になる。
- その式が反復法で解けるかどうかは、方程式の設定次第

  →ここで解を発散させない＝うまく方程式を立てる

  ことが、数値計算上重要なテクニックである。

数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

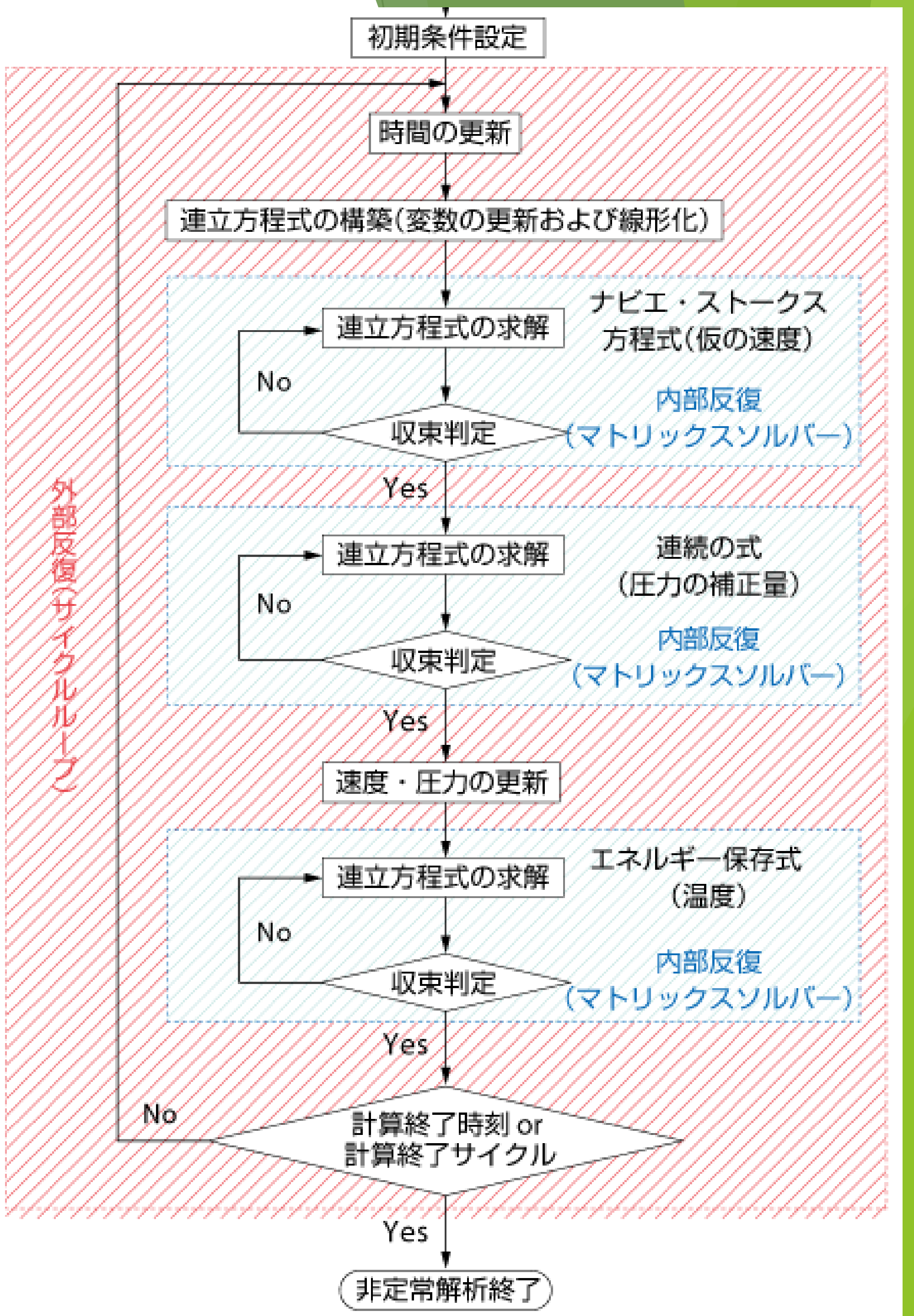
解析がどのように進んでいくか

- 内部反復

その時間での物理量を求めるために、予想した値を支配方程式に代入して残差が小さくなるまで行う計算のこと。

- 外部反復

時間的な進行を担い、複数の内部反復を含む。１ステップ前の状況に応じて、支配方程式を作る。



数値流体力学を、さらに細かくみていく（具体例の掘り下げ）

- 計算能力の話

PCやスマホなど計算機の向上はすさまじい。

数値シミュレーションも実用的になってきたが・・・

$$N = \left[O\left(\frac{L}{l}\right)\right]^3 = O(Re^{9/4})$$

直接流体計算には、レイノルズ数の4分の9乗の格子点数が必要。例えば人が 1 m/sで歩く周囲流れの計算には、10^9オーダーの格子点について計算しなければならなず、非常に計算負荷がかかる

現状は、時間平均やモデル化を駆使し、現象の再現性と計算負荷のトレードオフをどうにかして改善していくのが研究者のかんがえているところである。

天気予報だってあまり当たらない、、
計算機能力はまだまだ必要！！

まとめ

- 世の中の「数値シミュレーション」には、必ず支配方程式がある！

- その支配方程式を、与えられた条件（計算したいものの条件）で
  どうやって解くか？　そこが考えどころ！

- 結局は、「効率の良いしらみつぶし」で解いている！時間をかければ必ず答えが見つかるように式を立てるなどする。

- そして、離散化やモデル化によりシミュレーションは必ず誤差を含む。あくまで模擬である。

ただし、その誤差が測定により生じる誤差より大きいとは限らない。

ご清聴ありがとうございました